Sphere-to-Rod Transitions of Nonionic Surfactant Micelles in Aqueous Solution Modeled by Molecular Dynamics Simulations

Velinova, Maria; Sengupta, Durba; Tadjer, Alia V.; Marrink, Siewert-Jan

Published in:
Langmuir

DOI:
10.1021/la203055t

Publication date:
2011

Sphere-to-rod transitions of nonionic surfactant micelles in aqueous solution modeled by molecular dynamics simulations

Maria Velinova[1], Durba Sengupta[2], Alia V. Tadjer[1], Siewert-Jan Marrink[2,]*

[1]Laboratory of Quantum and Computational Chemistry, Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Sofia, 1 James Bourchier Ave., 1164 Sofia, Bulgaria

[2]Groningen Biomolecular Sciences and Biotechnology Institute and Zernike Institute for Advanced Materials, University of Groningen, Nijenborgh 4, 9747 AG Groningen, The Netherlands

*Corresponding author: E-mail: tadjer@chem.uni-sofia.bg ; Tel.: ++359-2-8161374, FAX: ++359-2-962-54-38

C12E5_CG.itp

```
[moleculetype]
; name exclusions
EO5       1

[atoms]
1      SP2    1      EO5    OH     1      0.000
2      SNa    1      EO5    O1     2      0.000
3      SNa    1      EO5    O1     3      0.000
4      SNa    1      EO5    O1     4      0.000
5      SNa    1      EO5    O1     5      0.000
6      SNa    1      EO5    O1     6      0.000
7      C1     1      EO5    C1     7      0.000
8      C1     1      EO5    C2     8      0.000
9      C1     1      EO5    C3     9      0.000

[ bonds ]
; backbonebackbone bonds
1      2      1      0.330  17000
2      3      1      0.330  17000
3      4      1      0.330  17000
4      5      1      0.330  17000
5      6      1      0.330  17000
6      7      1      0.370  1250
7      8      1      0.470  1250
8      9      1      0.470  1250

[angles]
;backbonebackbonebackbone angles
1      2      3      1      130.00       50
2      3      4      1      130.00       50
3      4      5      1      130.00       50
4      5      6      1      130.00       50
5      6      7      2      120.00       25
6      7      8      2      180.00       25
7      8      9      2      180.00       25

[dihedrals]
1      2      3      4      1    180.00    1.96   1
1      2      3      4      1    0         0.18   2
1      2      3      4      1    0         0.33   3
1      2      3      4      1    0         0.12   4
2      3      4      5      1    180.00    1.96   1
2      3      4      5      1    0         0.18   2
2      3      4      5      1    0         0.33   3
2      3      4      5      1    0         0.12   4
3      4      5      6      1    180.00    1.96   1
3      4      5      6      1    0         0.18   2
3      4      5      6      1    0         0.33   3
3      4      5      6      1    0         0.12   4
```

C12E5_AA.itp

```
[ moleculetype ]
; Name            nrexcl
Other               3

[ atoms ]
;   nr       type  resnr residue  atom   cgnr     charge       mass  typeB
chargeB      massB
; residue   1 CE5 rtp CE5  q  0.0
     1         CT      1    CE5     C1      1      -0.18      12.01   ; qtot -0.18
     2         CT      1    CE5     C2      2      -0.18      12.01   ; qtot -0.36
     3         CT      1    CE5     C3      3      -0.18      12.01   ; qtot -0.54
     4         CT      1    CE5     C4      4      -0.18      12.01   ; qtot -0.72
     5         CT      1    CE5     C5      5      -0.18      12.01   ; qtot -0.9
     6         CT      1    CE5     C6      6      -0.18      12.01   ; qtot -1.08
     7         CT      1    CE5     C7      7      -0.18      12.01   ; qtot -1.26
     8         CT      1    CE5     C8      8      -0.18      12.01   ; qtot -1.44
     9         CT      1    CE5     C9      9       0.27      12.01   ; qtot -1.17
    10         OS      1    CE5     O1     10      -0.41         16   ; qtot -1.58
    11         CT      1    CE5     CA     10      0.079      12.01   ; qtot -1.501
    12         CT      1    CE5     CB     10      0.107      12.01   ; qtot -1.394
    13         OS      1    CE5     O2     11      -0.41         16   ; qtot -1.804
    14         CT      1    CE5     CC     11      0.079      12.01   ; qtot -1.725
    15         CT      1    CE5     CD     11      0.107      12.01   ; qtot -1.618
    16         OS      1    CE5     O3     12      -0.41         16   ; qtot -2.028
    17         CT      1    CE5     CE     12      0.079      12.01   ; qtot -1.949
    18         CT      1    CE5     CF     12      0.107      12.01   ; qtot -1.842
    19         OS      1    CE5     O4     13     -0.609         16   ; qtot -2.451
    20         CT      1    CE5     CG     14      -0.18      12.01   ; qtot -2.631
    21         CT      1    CE5     CH     15      -0.18      12.01   ; qtot -2.811
    22         CT      1    CE5     CI     16      -0.27      12.01   ; qtot -3.081
    23         HC      1    CE5     H1     17       0.09      1.008   ; qtot -2.991
    24         HC      1    CE5     H2     17       0.09      1.008   ; qtot -2.901
    25         HC      1    CE5     H3     18       0.09      1.008   ; qtot -2.811
    26         HC      1    CE5     H4     18       0.09      1.008   ; qtot -2.721
    27         HC      1    CE5     H5     19       0.09      1.008   ; qtot -2.631
    28         HC      1    CE5     H6     19       0.09      1.008   ; qtot -2.541
    29         HC      1    CE5     H7     20       0.09      1.008   ; qtot -2.451
    30         HC      1    CE5     H8     20       0.09      1.008   ; qtot -2.361
    31         HC      1    CE5     H9     21       0.09      1.008   ; qtot -2.271
    32         HC      1    CE5     HA     21       0.09      1.008   ; qtot -2.181
    33         HC      1    CE5     HB     22       0.09      1.008   ; qtot -2.091
    34         HC      1    CE5     HC     22       0.09      1.008   ; qtot -2.001
    35         HC      1    CE5     HD     23       0.09      1.008   ; qtot -1.911
    36         HC      1    CE5     HE     23       0.09      1.008   ; qtot -1.821
    37         HC      1    CE5     HF     24       0.09      1.008   ; qtot -1.731
    38         HC      1    CE5     HG     24       0.09      1.008   ; qtot -1.641
    39         H1      1    CE5     HH     25     -0.015      1.008   ; qtot -1.656
    40         H1      1    CE5     HI     25     -0.015      1.008   ; qtot -1.671
    41         H1      1    CE5     HJ     26       0.06      1.008   ; qtot -1.611
    42         H1      1    CE5     HK     26       0.06      1.008   ; qtot -1.551
    43         H1      1    CE5     HL     26      0.052      1.008   ; qtot -1.499
    44         H1      1    CE5     HM     26      0.052      1.008   ; qtot -1.447
    45         H1      1    CE5     HN     27       0.06      1.008   ; qtot -1.387
    46         H1      1    CE5     HO     27       0.06      1.008   ; qtot -1.327
    47         H1      1    CE5     HP     27      0.052      1.008   ; qtot -1.275
    48         H1      1    CE5     HQ     27      0.052      1.008   ; qtot -1.223
    49         H1      1    CE5     HR     28       0.06      1.008   ; qtot -1.163
    50         H1      1    CE5     HS     28       0.06      1.008   ; qtot -1.103
    51         H1      1    CE5     HT     28      0.052      1.008   ; qtot -1.051
    52         H1      1    CE5     HU     28      0.052      1.008   ; qtot -0.999
    53         HO      1    CE5     HV     29      0.369      1.008   ; qtot -0.63
    54         HC      1    CE5     HW     30       0.09      1.008   ; qtot -0.54
    55         HC      1    CE5     HX     30       0.09      1.008   ; qtot -0.45
    56         HC      1    CE5     HY     31       0.09      1.008   ; qtot -0.36
    57         HC      1    CE5     HZ     31       0.09      1.008   ; qtot -0.27
    58         HC      1    CE5     H0     32       0.09      1.008   ; qtot -0.18
```

```
    59         HC      1    CE5    H10     32       0.09      1.008   ; qtot -0.09
    60         HC      1    CE5    H11     32       0.09      1.008   ; qtot 0
    61         OS      1    CE5     O5     33      -0.41         16   ; qtot -0.41
    62         CT      1    CE5     CJ     33      0.079      12.01   ; qtot -0.331
    63         CT      1    CE5     CK     33      0.107      12.01   ; qtot -0.224
    64         OS      1    CE5     O6     34      -0.41         16   ; qtot -0.634
    65         CT      1    CE5     CL     34      0.079      12.01   ; qtot -0.555
    66         CT      1    CE5     CM     34      0.107      12.01   ; qtot -0.448
    67         H1      1    CE5    H12     35       0.06      1.008   ; qtot -0.388
    68         H1      1    CE5    H13     35       0.06      1.008   ; qtot -0.328
    69         H1      1    CE5    H14     35      0.052      1.008   ; qtot -0.276
    70         H1      1    CE5    H15     35      0.052      1.008   ; qtot -0.224
    71         H1      1    CE5    H16     36       0.06      1.008   ; qtot -0.164
    72         H1      1    CE5    H17     36       0.06      1.008   ; qtot -0.104
    73         H1      1    CE5    H18     36      0.052      1.008   ; qtot -0.052
    74         H1      1    CE5    H19     36      0.052      1.008   ; qtot 0

[ bonds ]
    1     2     1
    1    20     1
    1    23     1
    1    24     1
    2     3     1
    2    25     1
    2    26     1
    3     4     1
    3    27     1
    3    28     1
    4     5     1
    4    29     1
    4    30     1
    5     6     1
    5    31     1
    5    32     1
    6     7     1
    6    33     1
    6    34     1
    7     8     1
    7    35     1
    7    36     1
    8     9     1
    8    37     1
    8    38     1
    9    10     1
    9    39     1
    9    40     1
   10    11     1
   11    12     1
   11    41     1
   11    42     1
   12    13     1
   12    43     1
   12    44     1
   13    14     1
   14    15     1
   14    45     1
   14    46     1
   15    16     1
   15    47     1
   15    48     1
   16    17     1
   17    18     1
   17    49     1
   17    50     1
   18    51     1
   18    52     1
   18    61     1
   19    53     1
```

```
   19    66     1
   20    21     1
   20    54     1
   20    55     1
   21    22     1
   21    56     1
   21    57     1
   22    58     1
   22    59     1
   22    60     1
   61    62     1
   62    63     1
   62    67     1
   62    68     1
   63    64     1
   63    69     1
   63    70     1
   64    65     1
   65    66     1
   65    71     1
   65    72     1
   66    73     1
   66    74     1
[ pairs ]
;  ai    aj funct
    1     4     1
    1    22     1
    1    27     1
    1    28     1
    1    56     1
    1    57     1
    2     5     1
    2    21     1
    2    29     1
    2    30     1
    2    54     1
    2    55     1
    3     6     1
    3    20     1
    3    23     1
    3    24     1
    3    31     1
    3    32     1
    4     7     1
    4    25     1
    4    26     1
    4    33     1
    4    34     1
    5     8     1
    5    27     1
    5    28     1
    5    35     1
    5    36     1
    6     9     1
    6    29     1
    6    30     1
    6    37     1
    6    38     1
    7    10     1
    7    31     1
    7    32     1
    7    39     1
    7    40     1
    8    11     1
    8    33     1
    8    34     1
    9    12     1
    9    35     1
```

9	36	1
9	41	1
9	42	1
10	13	1
10	37	1
10	38	1
10	43	1
10	44	1
11	14	1
11	39	1
11	40	1
12	15	1
12	45	1
12	46	1
13	16	1
13	41	1
13	42	1
13	47	1
13	48	1
14	17	1
14	43	1
14	44	1
15	18	1
15	49	1
15	50	1
16	45	1
16	46	1
16	51	1
16	52	1
16	61	1
17	47	1
17	48	1
17	62	1
18	63	1
18	67	1
18	68	1
19	64	1
19	71	1
19	72	1
20	25	1
20	26	1
20	58	1
20	59	1
20	60	1
21	23	1
21	24	1
22	54	1
22	55	1
23	25	1
23	26	1
23	54	1
23	55	1
24	25	1
24	26	1
24	54	1
24	55	1
25	27	1
25	28	1
26	27	1
26	28	1
27	29	1
27	30	1
28	29	1
28	30	1
29	31	1
29	32	1
30	31	1
30	32	1

```
   31    33     1
   31    34     1
   32    33     1
   32    34     1
   33    35     1
   33    36     1
   34    35     1
   34    36     1
   35    37     1
   35    38     1
   36    37     1
   36    38     1
   37    39     1
   37    40     1
   38    39     1
   38    40     1
   41    43     1
   41    44     1
   42    43     1
   42    44     1
   45    47     1
   45    48     1
   46    47     1
   46    48     1
   49    51     1
   49    52     1
   49    61     1
   50    51     1
   50    52     1
   50    61     1
   51    62     1
   52    62     1
   53    65     1
   53    73     1
   53    74     1
   54    56     1
   54    57     1
   55    56     1
   55    57     1
   56    58     1
   56    59     1
   56    60     1
   57    58     1
   57    59     1
   57    60     1
   61    64     1
   61    69     1
   61    70     1
   62    65     1
   63    66     1
   63    71     1
   63    72     1
   64    67     1
   64    68     1
   64    73     1
   64    74     1
   65    69     1
   65    70     1
   67    69     1
   67    70     1
   68    69     1
   68    70     1
   71    73     1
   71    74     1
   72    73     1
   72    74     1

[ angles ]
```

```
;  ai    aj    ak funct
    2     1    20     1
    2     1    23     1
    2     1    24     1
   20     1    23     1
   20     1    24     1
   23     1    24     1
    1     2     3     1
    1     2    25     1
    1     2    26     1
    3     2    25     1
    3     2    26     1
   25     2    26     1
    2     3     4     1
    2     3    27     1
    2     3    28     1
    4     3    27     1
    4     3    28     1
   27     3    28     1
    3     4     5     1
    3     4    29     1
    3     4    30     1
    5     4    29     1
    5     4    30     1
   29     4    30     1
    4     5     6     1
    4     5    31     1
    4     5    32     1
    6     5    31     1
    6     5    32     1
   31     5    32     1
    5     6     7     1
    5     6    33     1
    5     6    34     1
    7     6    33     1
    7     6    34     1
   33     6    34     1
    6     7     8     1
    6     7    35     1
    6     7    36     1
    8     7    35     1
    8     7    36     1
   35     7    36     1
    7     8     9     1
    7     8    37     1
    7     8    38     1
    9     8    37     1
    9     8    38     1
   37     8    38     1
    8     9    10     1
    8     9    39     1
    8     9    40     1
   10     9    39     1
   10     9    40     1
   39     9    40     1
    9    10    11     1
   10    11    12     1
   10    11    41     1
   10    11    42     1
   12    11    41     1
   12    11    42     1
   41    11    42     1
   11    12    13     1
   11    12    43     1
   11    12    44     1
   13    12    43     1
   13    12    44     1
   43    12    44     1
```

```
12    13    14     1
13    14    15     1
13    14    45     1
13    14    46     1
15    14    45     1
15    14    46     1
45    14    46     1
14    15    16     1
14    15    47     1
14    15    48     1
16    15    47     1
16    15    48     1
47    15    48     1
15    16    17     1
16    17    18     1
16    17    49     1
16    17    50     1
18    17    49     1
18    17    50     1
49    17    50     1
17    18    51     1
17    18    52     1
17    18    61     1
51    18    52     1
51    18    61     1
52    18    61     1
53    19    66     1
 1    20    21     1
 1    20    54     1
 1    20    55     1
21    20    54     1
21    20    55     1
54    20    55     1
20    21    22     1
20    21    56     1
20    21    57     1
22    21    56     1
22    21    57     1
56    21    57     1
21    22    58     1
21    22    59     1
21    22    60     1
58    22    59     1
58    22    60     1
59    22    60     1
18    61    62     1
61    62    63     1
61    62    67     1
61    62    68     1
63    62    67     1
63    62    68     1
67    62    68     1
62    63    64     1
62    63    69     1
62    63    70     1
64    63    69     1
64    63    70     1
69    63    70     1
63    64    65     1
64    65    66     1
64    65    71     1
64    65    72     1
66    65    71     1
66    65    72     1
71    65    72     1
19    66    65     1
19    66    73     1
19    66    74     1
```

```
   65    66    73     1
   65    66    74     1
   73    66    74     1

[ dihedrals ]
;  ai    aj    ak    al funct
   20     1     2     3     9
   20     1     2    25     9
   20     1     2    26     9
   23     1     2     3     9
   23     1     2    25     9
   23     1     2    26     9
   24     1     2     3     9
   24     1     2    25     9
   24     1     2    26     9
    2     1    20    21     9
    2     1    20    54     9
    2     1    20    55     9
   23     1    20    21     9
   23     1    20    54     9
   23     1    20    55     9
   24     1    20    21     9
   24     1    20    54     9
   24     1    20    55     9
    1     2     3     4     9
    1     2     3    27     9
    1     2     3    28     9
   25     2     3     4     9
   25     2     3    27     9
   25     2     3    28     9
   26     2     3     4     9
   26     2     3    27     9
   26     2     3    28     9
    2     3     4     5     9
    2     3     4    29     9
    2     3     4    30     9
   27     3     4     5     9
   27     3     4    29     9
   27     3     4    30     9
   28     3     4     5     9
   28     3     4    29     9
   28     3     4    30     9
    3     4     5     6     9
    3     4     5    31     9
    3     4     5    32     9
   29     4     5     6     9
   29     4     5    31     9
   29     4     5    32     9
   30     4     5     6     9
   30     4     5    31     9
   30     4     5    32     9
    4     5     6     7     9
    4     5     6    33     9
    4     5     6    34     9
   31     5     6     7     9
   31     5     6    33     9
   31     5     6    34     9
   32     5     6     7     9
   32     5     6    33     9
   32     5     6    34     9
    5     6     7     8     9
    5     6     7    35     9
    5     6     7    36     9
   33     6     7     8     9
   33     6     7    35     9
   33     6     7    36     9
   34     6     7     8     9
   34     6     7    35     9
```

34	6	7	36	9
6	7	8	9	9
6	7	8	37	9
6	7	8	38	9
35	7	8	9	9
35	7	8	37	9
35	7	8	38	9
36	7	8	9	9
36	7	8	37	9
36	7	8	38	9
7	8	9	10	9
7	8	9	39	9
7	8	9	40	9
37	8	9	10	9
37	8	9	39	9
37	8	9	40	9
38	8	9	10	9
38	8	9	39	9
38	8	9	40	9
8	9	10	11	9
39	9	10	11	9
40	9	10	11	9
9	10	11	12	9
9	10	11	41	9
9	10	11	42	9
10	11	12	13	9
10	11	12	43	9
10	11	12	44	9
41	11	12	13	9
41	11	12	43	9
41	11	12	44	9
42	11	12	13	9
42	11	12	43	9
42	11	12	44	9
11	12	13	14	9
43	12	13	14	9
44	12	13	14	9
12	13	14	15	9
12	13	14	45	9
12	13	14	46	9
13	14	15	16	9
13	14	15	47	9
13	14	15	48	9
45	14	15	16	9
45	14	15	47	9
45	14	15	48	9
46	14	15	16	9
46	14	15	47	9
46	14	15	48	9
14	15	16	17	9
47	15	16	17	9
48	15	16	17	9
15	16	17	18	9
15	16	17	49	9
15	16	17	50	9
16	17	18	51	9
16	17	18	52	9
16	17	18	61	9
49	17	18	51	9
49	17	18	52	9
49	17	18	61	9
50	17	18	51	9
50	17	18	52	9
50	17	18	61	9
17	18	61	62	9
51	18	61	62	9
52	18	61	62	9
53	19	66	65	9

53	19	66	73	9
53	19	66	74	9
1	20	21	22	9
1	20	21	56	9
1	20	21	57	9
54	20	21	22	9
54	20	21	56	9
54	20	21	57	9
55	20	21	22	9
55	20	21	56	9
55	20	21	57	9
20	21	22	58	9
20	21	22	59	9
20	21	22	60	9
56	21	22	58	9
56	21	22	59	9
56	21	22	60	9
57	21	22	58	9
57	21	22	59	9
57	21	22	60	9
18	61	62	63	9
18	61	62	67	9
18	61	62	68	9
61	62	63	64	9
61	62	63	69	9
61	62	63	70	9
67	62	63	64	9
67	62	63	69	9
67	62	63	70	9
68	62	63	64	9
68	62	63	69	9
68	62	63	70	9
62	63	64	65	9
69	63	64	65	9
70	63	64	65	9
63	64	65	66	9
63	64	65	71	9
63	64	65	72	9
64	65	66	19	9
64	65	66	73	9
64	65	66	74	9
71	65	66	19	9
71	65	66	73	9
71	65	66	74	9
72	65	66	19	9
72	65	66	73	9
72	65	66	74	9

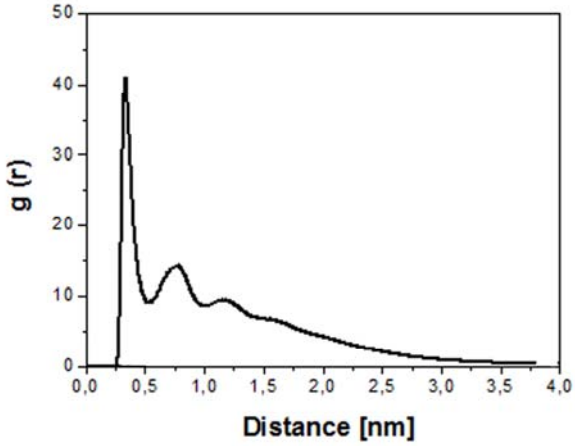

Figure S1. RDF of the distance between tail-tail COM in system 1

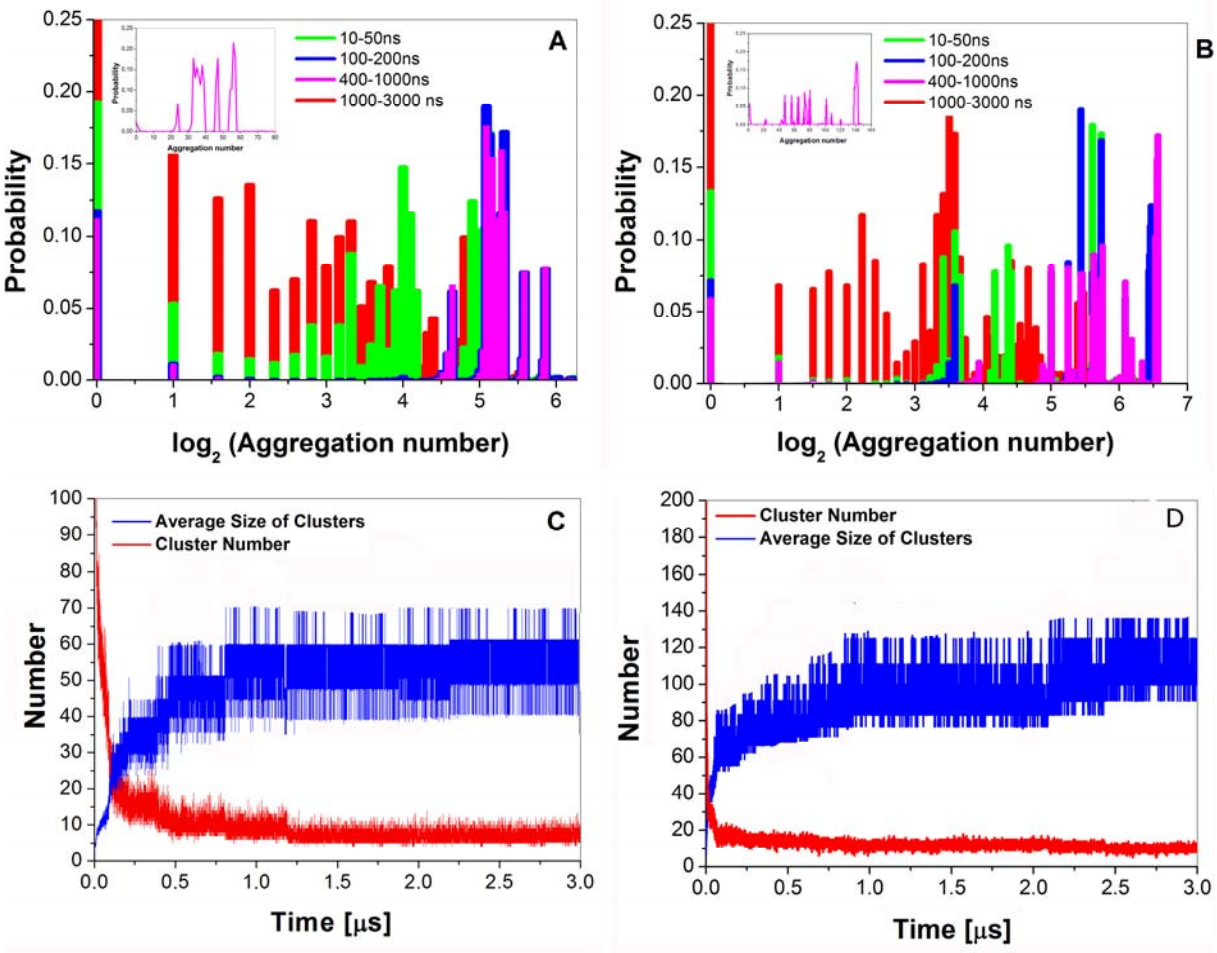

Figure S2. Evolution of cluster size distribution (A,B) and cluster number (C,D) for $C_{12}E_5$ in diluted system with 360 surfactants at χ=0.19 (A,C) and concentrated system with 780 surfactants at χ=0.33 (B,D)